

Азави А.К., аспирант
Саввин В.С., доц., канд. физ.-мат. наук
Повзнер А.А., проф., д-р физ.-мат. наук

КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ ПО ИССЛЕДОВАНИЮ РОСТА ПРОМЕЖУТОЧНЫХ ФАЗ В СИСТЕМАХ С ИНТЕРМЕТАЛЛИДАМИ

В диффузионной зоне при конкурентном росте промежуточной жидкой фазы макроскопическая промежуточная твёрдая фаза не успевает формироваться. В результате при диффузионном формировании жидкая прослойка наряду с жидкими растворами равновесного состава должна включать метастабильную жидкость. Однако, ввиду того, что промежуточные твёрдые фазы в рассматриваемых условиях не могут сформироваться, предполагается реализация альтернативной диффузионной зоны (рис. 1).

Критерием наличия метастабильных участков жидкости в диффузионной зоне является отклонение граничных составов жидкости от равновесного ликвидуса. Экспериментальное исследование системы висмут-индий показало, что отклонение от линий ликвидуса, которое можно интерпретировать как следствие наличия метастабильных участков жидкой прослойки, лежит либо в пределах 95%-ной области погрешностей результата, либо незначительно выходит за пределы указанного коридора погрешностей и смещена в сторону висмута. При этом всегда граничная концентрация жидкости далека от значений метастабильных ликвидусов.

Для объяснения полученного результата выдвинута гипотеза, согласно которой наряду с диффузионными процессами и плавлением твёрдых образцов происходит кристаллизация образующихся областей метастабильной жидкости.

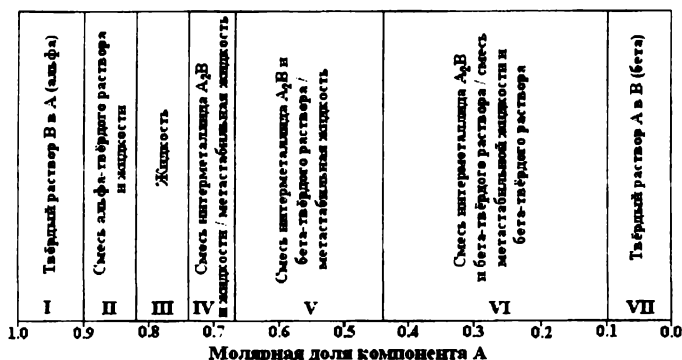


Рис. 1

Для подтверждения приведённой гипотезы построена компьютерная модель и проведён соответствующий компьютерный эксперимент.

Исследовалась модельная изотермическая система А-В при температуре 85°С, то есть выше температуры плавления легкоплавкой эвтектики Bi-In (72°С) и ниже температуры плавления интерметаллида BiIn₂ (89°С). Метастабильная часть ликвидуса образована экстраполяцией линии ликвидуса, прилегающей к чистому висмуту, в область низких температур.

На рис. 1 показан участок диаграммы состояния исследуемой с помощью компьютерного эксперимента модельной системы при 85°С, содержащий как стабильные, так и метастабильные области.

Компьютерный эксперимент осуществляется с помощью программы, базирующейся на методологии клеточных автоматов. Правила обмена между ячейками зависят от их фазового состояния. Наличие в системе интерметаллида требует учёта возможности образования в диффузионной зоне метастабильных участков. Если компонентный состав ячейки соответствует областям I, II, III, а также VII показанного на рис. 1 участка диаграммы, в которых вещество не может находиться в метастабильном состоянии, то расчёт фазового состава таких ячеек не требует введения новых правил. Если же компонентный состав ячеек соответствует областям IV, V и VI, то ячейка с той или иной степенью вероятности может содержать вещество как в стабильном, так и в метастабильном состоянии.

Фазовый состав ячеек, соответствующих областям диаграммы состояния IV, V и VI, устанавливался на основе следующих правил. Если ячейка уже содержит интерметаллид, то есть стабильную фазу, то контактирующая с этим интерметаллидом и растворяющая его жидкость может быть только стабильной и соответствовать стабильной диаграмме состояния. В противном случае существует вероятность, что ячейка полностью состоит из метастабильной жидкости – области диаграммы IV и V, или частично состоит из метастабильной жидкости, находящейся в контакте с твёрдым β-раствором – область диаграммы VI. Вероятность существования метастабильного состояния должна убывать с увеличением степени неравновесности, то есть по мере удаления состава от равновесного ликвидуса в сторону компонента В.

Для выяснения фазового состояния вещества в ячейке в случае возможности метастабильного состояния с помощью генератора случайных чисел на отрезке [0, 1] выбирается случайное число r . С этим числом сравнивается величина

$$\mu(\alpha) = \left(\frac{c - c_{L2}}{c_{S2m} - c_{L2}} \right)^{\alpha}.$$

Величина в скобках, представляющая собой степень стабильности, в пределах областей IV, V и VI принимает значения на отрезке [0, 1], c , c_{L2} , c_{S2m} – мольные доли компонента А в ячейке, на линии ликвидуса и линии метастабильного солидуса. С помощью показателя метастабильности α можно регулировать способность расплава к переохлаждению (пересыщению). При $\mu \leq r$ фазовый состав ячейки определяется по метастабильной диаграмме состояния, в противном случае, то есть при $\mu > r$, – по стабильной.

При $\alpha > 1$ вероятность возникновения и сохранения метастабильного состояния возрастает, так как $\mu(\alpha > 1) < \mu(1)$.

По мере увеличения показателя метастабильности α возрастает вероятность возникновения метастабильных состояний и время их существования.

Метастабильный ликвидус с концентрацией компонента А $c_{L2_m} = 0.442$ реализуется достаточно часто и существует в течение заметных промежутков времени.

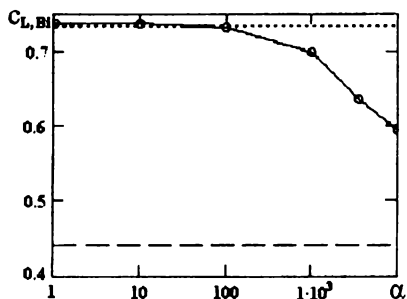


Рис. 2

Прямым усреднением по времени измерялась концентрация жидкости на границе с кристаллом со стороны компонента В при различных значениях показателя метастабильности α . Результаты, представленные на рис. 2, показывают, что при значениях показателя метастабильности $\alpha \leq 100$ измеряемая граничная концентрация практически не отличается от равновесной концентрации (верхняя горизонтальная прерывистая линия); при $\alpha > 100$ всё более отклоняется от равновесной концентрации с ростом α , приближаясь к метастабильному ликвидусу (нижняя горизонтальная прерывистая линия). Полученный в компьютерном эксперименте результат качественно соответствует выводам из результатов реального эксперимента по исследованию системы висмут-индий.